

1. 研究領域名：ナノリンク分子の電気伝導

2. 研究期間：平成17年度～平成21年度

3. 領域代表者：川合 真紀（東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授）

#### 4. 領域代表者からの報告

##### (1) 研究領域の目的及び意義

電極に接合した分子系、「ナノリンク分子」の電気伝導物性では、分子と電極の接合が重要な役割を担うにもかかわらず、これまでこの接合をあからさまに取り上げた議論はなおざりになっていた。このような時代的背景のもと、本領域では、「1分子エレクトロニクス研究」に新たな指導原理の確立を目指し、物性物理学、合成化学、表面科学の融合により、以下のような研究を推進する。

A01 班は、走査トンネル顕微鏡/トンネル分光や微細加工により作製した固定電極を用いてモデルナノリンク分子の電気伝導特性の計測を行い輸送特性の解明を目指す。A02 班は、ナノリンク分子の電子輸送を決定する分子・電極接合部の局所電子状態やキャリアダイナミクスの解明を行う。A03 班は、表面反応や電気化学反応による分子-電極接合系の構造・電子状態の精密制御法の開拓を行う。A04 班は、共役分子系や金属錯体型超分子など新規機能性分子の創製と電極への固定化法の開発を行う。A05 班は、大規模第一原理計算による分子-電極系の構造・電子状態の研究と非平衡開放系の理論による電子輸送過程における多体効果の解析を行う。

以上の研究を緊密な連携の下で展開し研究成果を結集することにより、ナノリンク分子の電気伝導特性に寄与する因子-分子・電極接合部の構造と電子状態、電子輸送過程における多体効果や分子振動とのカップリングなど-とその機構を明らかにし、多彩な分子の性質を利用した単分子スイッチや単分子トランジスターなど単分子デバイスを実現するロードマップを示す。

##### (2) 研究の進展状況及び成果の概要

分子-電極系の設計、伝導の基礎学理の構築に向け、大きな進展があった。新たな分子-金属電極間接合の探索を行い、良好なコンタクトを形成する系としてイソシアナートおよびアルキルカルベンとPt電極、金電極とアミノ基との接合などが新たに見つかった。分子架橋系での伝導度測定では、Au-S から Au-NH<sub>2</sub> に変えることで2置換ベンゼン単分子接合の伝導度が1桁近く増大した。フェロセンやジベンゾホスホールスルフィドも優れたアンカーの候補と成ることが判明した。また、接点構造を化学反応により可逆的に変換できるシステムが発見され、接点構造を利用した単分子スイッチとしての機能が期待される。遷移金属の単原子ワイヤー作製に世界で初めて成功し、分子架橋系の電極としての利用が可能となった。長鎖アルカンチオレート of 接点付近の電子構造の研究からは、この分子が金属的な電子構造と絶縁体的な電子構造を併せ持つ分子とみなせることが判明した。これらの知見は、単分子デバイス実現に大きな力となるものである。また、有機物単結晶を用いた有機トランジスターでは、印加電圧による制御で両極性伝導や光トランジスタが初めて実現した。単結晶トランジスタは移動度も高く、実用化に向け更なる研究が待望されている。

#### 5. 審査部会における所見

##### A (現行のまま推進すればよい)

本研究領域は、電極-分子接合に注目し、単一分子電子素子の電気特性に関する学理の構築と、新たな分子接合の創製を目指すものである。これまでの研究では電極の金属と分子の多種多様な接合が実現され、接合部の導伝率測定を中心に着実な成果が上がっている。これらの成果を、注目度の高い優れた学術雑誌に論文として数多く発表するとともに、国内外のシンポジウムを通じて積極的に公表している。招待講演も数多く受けており、参画する研究者の研究遂行能力、本研究の重要性に関する社会的認知度と注目度がきわめて高いことも明らかである。以上のことから、本研究については現行のまま推進すればよいと判断した。